

Evert Jan Baerends i la densitat electrònica de molècules

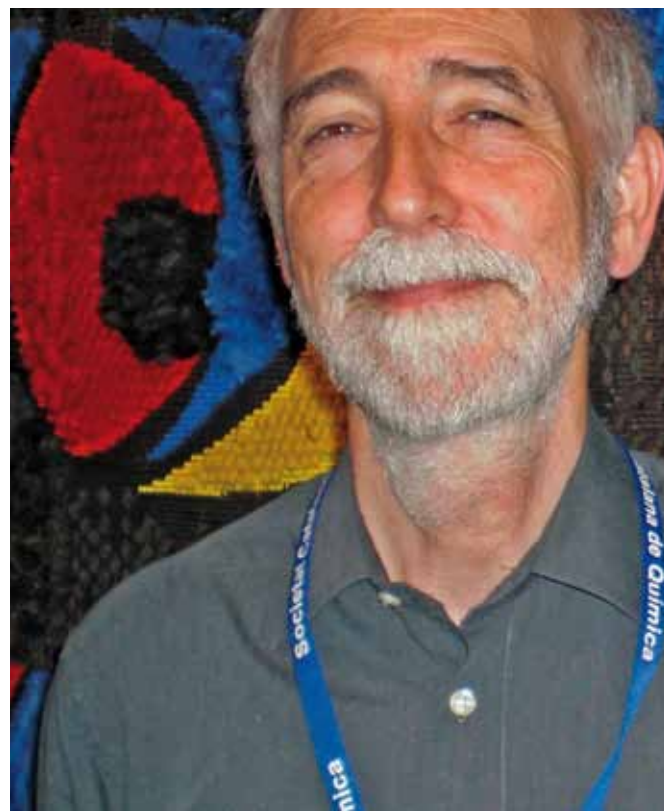
Evert Jan Baerends és catedràtic de la Universitat Lliure d'Amsterdam i de la Universitat de Ciència i Tecnologia de Pohang de Corea del Sud. És un dels impulsors de l'Amsterdam Density Functional Program System, la teoria que ha revolucionat el camp de la química teòrica i computacional moderna. La importància de la densitat electrònica es va fer patent l'any 1964, quan Walter Kohn (Premi Nobel 1998) va demostrar que totes les propietats de les molècules es poden caracteritzar a partir del coneixement de la densitat. Ha assistit al Girona Seminar, convidat per l'Institut de Química Computacional de la UdG.

Com és que la química computacional, una disciplina que requereix ordinadors potentíssims per avançar, alhora també es pot expressar amb un llapis i un paper?

Per dir-ho senzill, treballem amb equacions que es poden resoldre molt fàcilment en un paper, però els sistemes als quals les apliquem són tan complexos que requereixen la potència de càlcul que donen els grans computadors, que necessiten dies o setmanes per proporcionar resultats.

Per què la química computacional no forma part del bagatge de tots els químics i, en canvi, s'ha constituït com un camp amb personalitat pròpia?

El desenvolupament de la teoria i, més endavant, de programes informàtics, ha estat molt complex i difícil. Aquest és el motiu



«El Girona Seminar de Química Computacional és una trobada molt important i de gran prestigi»



pel qual s'ha constituït com una branca específica de la química. Malgrat tot, em sembla que en deu o quinze anys tots els químics, siguin de la branca que siguin, faran servir la química computacional en el dia a dia de la seva praxi de laboratori.

La densitat electrònica ha centrat el seminari. Quina importància té?

La densitat electrònica és una propietat que sabem calcular. Amb ella podem esbrinar aspectes com el color del compost, quin tipus d'espectroscòpia requereix, la llum infraroja que desprèn... Amb tot, la gran importància de la densitat electrònica és que el seu coneixement proporciona la possibilitat de calcular qualsevol de les propietats de la molècula.

En un món globalitzat, amb països emergents amb milions d'investigadors, quin ha de ser el paper d'Europa, especialment en el camp de la química?

Pel que fa a la química, la Xina i en general els països d'Àsia no són competitius. Els Estats Units i Europa són els que marquen el pas. Penso que continuarem així encara molts anys. Només cal fixar-se que al Girona Seminar, que és una trobada molt important i de gran prestigi, tan sols hi ha assistit un professor japonès. Ara bé, els països asiàtics tenen molta ambició per aprendre i inverteixen grans quantitats de diners en recerca.

Vostè que ensenya i fa recerca a Europa i Àsia, hi troba diferències?

Els estudiants asiàtics són molt ambiciosos. Penso que, fins i tot, potser una mica massa. Estudien i treballen de valent, però

«Fa vint anys, el professor Ramon Carbó-Dorca, em va convidar a Girona per primera vegada, quan va organitzar una conferència sobre química i física.»

encara no fan un balanç entre la feina que desenvolupen i els resultats que obtenen. Potser estan massa abocats al treball i poc a la reflexió.

Com veu el grup de químics computacionals de Girona?

Conec des de fa molt de temps Ramon Carbó-Dorca. Fa vint anys em va convidar a Girona per primera vegada, quan va organitzar una conferència sobre química i física. He descobert que ha sabut crear un gran equip i un molt bon ambient.